



TITLE:

液体金属の自己拡散(液体金属の物性と構造に関する研究討論会(第1回)報告,研究会報告)

AUTHOR(S):

市川, 和彦; 下地, 光雄

CITATION:

市川, 和彦 ...[et al]. 液体金属の自己拡散(液体金属の物性と構造に関する研究討論会(第1回)報告,研究会報告). 物性研究 1969, 12(6): 527-527

ISSUE DATE:

1969-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/87189>

RIGHT:

液体金属の自己拡散

北大理 市川和彦, 下地光雄

液体金属の振動型ポテンシャルを使って, 自己拡散係数, D , を linear trajectory の方法^{1,2)} および small step diffusion^{2,3)} の方法で計算した。hard-core friction coefficient ζ^H は soft friction coefficient ζ^S と同程度若しくはそれ以上の大きになることがわかった。Table 1 に $D = K_B T / (\zeta^H + \zeta^S)$ なる関係から得られた結果 (ただし代表として linear trajectory の方法のみ) を例示する。D の温度変化は二体相関函数 $g(r)$ に剛体球に対する P. Y. 式を用いて評価したところ (Na に対して), 大体実験結果と似た傾向を示す。

Table 1. Self-diffusion coefficients, $\text{cm}^2 \text{ sec}^{-1}$

(linear trajectory method).

Metal	$t^\circ\text{C}$	$10^5 \cdot D_{BG}$	$10^5 \cdot D_{PY}$	$10^5 \cdot D_{EXP}$
Na	100	7.86	10.33	4.14
K	65	7.55	10.17	4.01
Hg	25	2.59	3.56	1.80
Pb	328	2.68	2.56	2.19

1) E.Helfand, Phys. Fluids 4 (1961) 1.

2) S.A.Rice and P.Gray, Statistical Mechanics of Simple Liquids, Interscience, (1965)

3) S.A.Rice and J.G.Kirkwood, J. Chem. Phys. 31 (1959) 901.